# Fizika trdne snovi

Barbara Horvat

17.12.2004

*1. domača naloga iz Fizike trdne snovi*

**Mreža kagome**

a) 1. **Bravaisova mreža, baza**

Mreža kagome je predstavljena kot ravninska mreža (2 dimenziji). Zato potrebujemo dva vektorja, s katerima opišemo cel prostor brez da bi dobili kako novo točko oz. da bi kakšna izginila. Če bi lahko našli taka dva vektorja, bi bila mreža Bravaisova. A naša mreža ni Bravaisova, saj že na oko vidimo, da v sredini šestkotnikov sproduciramo še en gradnik ne glede na izbiro vektorjev "Bravaisove mreže". Lahko pa sproduciramo Bravaisovo mrežo z bazo: skupaj damo par gradnikov v enoto s katero lahko tvorimo Bravaisovo mrežo (v kristalu je to vedno možno - periodičnost). Na Sliki1 je razvidno, kako sem si izbrala enoto, s katero lahko tvorimo trikotno mrežo, ki je Bravaisova. Taki mreži rečemo trikotna mreža z bazo (tu baza ne pomeni "matematične"baze). Vektorje <u>Bravaisove mreže</u> (primitivne vektorje, vektorje, ki "povezujejo"enote) lahko potemtakem zapišemo:

$$\vec{\mathbf{a}}_\mathbf{1} = \mathbf{2a(1,0,0)}$$

$$\vec{\mathbf{a}}_\mathbf{2} = \mathbf{2a(\frac{1}{2},\frac{\sqrt{3}}{2},0)}$$

Tu je $a$ seveda razdalja med sosednjima gradnikoma kagome.
Pri takem opisu mreže pa moramo še povedati kakšna je baza oz. vektorji, s katerimi povemo povezavo med gradniki v enoti Bravaisove mreže z <u>bazo</u>:

$$\vec{\mathbf{r}}_\mathbf{0} = \mathbf{0}$$

$$\vec{\mathbf{r}}_\mathbf{1} = \mathbf{a(1,0,0)}$$

$$\vec{\mathbf{r}}_\mathbf{2} = \mathbf{a(\frac{1}{2},\frac{\sqrt{3}}{2},0)}$$

Število teh vektorjev mora ustrezati številu gradnikov v enoti.

2. **Primitivna celica**

   Primitivna celica je najmanjša osnovna celica s katero lahko pokrijemo cel prostor in to le s translacijo z Bravaisovimi vektorji. Vsebovati sme samo eno enoto, katera pa je lahko iz več gradnikov (atomov, molekul...). Iskanja primitivne celice se lahko lotimo tako, da poiščemo Wigner-Seitzovo celico (recipročna Wigner-Seitzova celica je prva Brillouinova cona). Strukturo, ki jo tako dobimo lahko vidimo na Sliki2. Ker naša mreža v originalu ni Bravaisova, je na tak način dobljena "primitivna" celica Vornoyev polihedron in ne prava primitivna celica. Pri Vornoyevem polihedronu moramo "Wigner-Seitzovo" celico še rotirati, da pokrijemo cel prostor. Sedaj pa še upoštevamo, da mora primitivna celica vsebovati eno točko oz. v našem primeru eno enoto oz. 3 gradnike (atome...) in tako dobimo primitivno celico, ki je sestavljena iz treh enot polihedrona (razvidno na Sliki2). S tem pa lahko sedaj pokrijemo cel prostor le s translacijo s primitivnimi vektorji.

   V vsaki primitivni celici smejo tako biti le trije gradniki. S tem pa lahko poiščemo še druge primitivne celice prikazano na spodnji sliki (te nisem obravnavala, a intenzitete bi morale biti enake).

3. **Recipročna mreža**

   Vektorje recipročne mreže izračunamo po formuli:

$$\vec{b}_i = 2\pi \frac{\vec{a}_j \times \vec{a}_k}{V_0}$$

   kjer je $V_0 = |(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)|$, $\vec{a}_i$ je vektor Bravaisove mreže, indekse $i, j, k = 1, 2, 3$ pa permutiramo ciklično.

   Vektorji Bravaisove mreže so :
   $\vec{a}_1 = 2a(1, 0, 0)$
   $\vec{a}_2 = 2a(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0)$
   $\vec{a}_3 = 2a(0, 0, c)$

   Vektorski produkti:
   $\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = 2a^2(0, 0, \sqrt{3})$
   $\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = 2a^2c(\sqrt{3}, -1, 0)$
   $\vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = 4a^2(0, c, 0)$

   Volumen:
   $V_0 = |(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)| = 4\sqrt{3}ca^3$

Vektorji recipročne mreže:

$$\vec{\mathbf{b}}_{\mathbf{1}} = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{V_0} = \frac{\pi}{\sqrt{\mathbf{3}}\mathbf{a}}(\sqrt{\mathbf{3}}, \mathbf{-1}, \mathbf{0})$$

$$\vec{\mathbf{b}}_{\mathbf{2}} = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{V_0} = \frac{\mathbf{2}\pi}{\sqrt{\mathbf{3}}\mathbf{a}}(\mathbf{0}, \mathbf{1}, \mathbf{0})$$

$$\vec{\mathbf{b}}_{\mathbf{3}} = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{V_0} = \frac{\pi}{\mathbf{ca}}(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{1})$$

b) 1. **Strukturni faktor**

Strukturni faktor lahko zapišemo kot:

$$S(\vec{K}) = \sum_{j=1}^{s} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_j} f_j$$

kjer $f_j$ atomski faktor (za iste atome je enak ($f_j = f$), za različne drugačen), $\vec{r}_j$ bazni vektor, s njihovo število, $\vec{K} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3$ pa vektor recipročne mreže. Torej je strukturni faktor enak:

$$\mathbf{S}(\vec{\mathbf{K}}) = \sum_{j=0}^{2} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_j} f_j = f(1 + e^{-i\vec{K}\cdot(1,0,0)a} + e^{-i\vec{K}\cdot(\frac{1}{2},\frac{\sqrt{3}}{2},0)a}) =$$

$$= \mathbf{f}(\mathbf{1} + \mathbf{e}^{-\mathbf{i}\pi\mathbf{m_1}} + \mathbf{e}^{-\mathbf{i}\pi\mathbf{m_2}})$$

Kot vidimo zadnji izrazne vsebuje $m_3$, kar pa je v redu, saj mi imamo 2D mrežo (tudi $r_i \forall i$ ima na mestu tretje koordinate vedno 0). Torej je odvisen le od $m_1$ in $m_2$. Vemo: $e^{-i\pi} = -1$. To upoštevamo v zadnjem izrazu in dobimo za strukturni faktor:

$$\mathbf{S}(\vec{\mathbf{K}}) = \begin{cases} 3f & \text{če} \quad m_1, m_2 soda \\ -f & \text{če} \quad m_1, m_2 liha \\ f & \text{sicer} \end{cases}$$

2. **Intenzitete za različne Braggove odboje**

Intenziteto lahko zapišemo kot:

$$I(\vec{K}) \propto N^2 |S(\vec{K})|^2$$

kjer $N$ predstavlja število celic, $S(\vec{K})$ pa je strukturni faktor. V našem primeru lahko potemtakem zapišemo:

$$I(\vec{K}) \propto N^2 |f(1 + e^{-i\pi m_1} + e^{-i\pi m_2})|^2$$

Naredimo tabelo:

| red | $m_i$ | $m_j$ | $I$ |
|---|---|---|---|
| sod | sod | sod | $9f^2$ |
| lih | lih | lih | $f^2$ |
| | lih | sod | $f^2$ |

Tu seveda $m_i \neq m_j$. Ničti red je kadar sta $m_i = 0$ in $m_j = 0$. Prvi red odboja je takrat, ko je vektor $\vec{K}_i = (m_{1i}, m_{2i}, m_{3i})$ najkrajši v dani smeri ($m_i$ je celo število), vsi višji pa so faktorji prvega ($n\vec{K}_i$ predstavlja n-ti red odboja v dani smeri).

c) **Maksimalna valovna dolžina žarkov X, da ločimo sipanje na mreži kagome od trikotne mreže**

Da mreži lahko razlikujemo, mora imeti tam kjer ima ena maksimalno intenziteto druga intenziteto 0 ali pa da dobimo različno število vrhov. Da pa mreži sploh lahko primerjamo, moramo imeti vektorje $\vec{a}_i$ in $\vec{b}_i$ $\forall i$ enake (če pa le niso enako dolgi, to pomeni, da so intenzitete povečane oz. zmanjšane oz. lahko dobimo ničelne vrhove, ki jih sploh ni(tj. če imamo povečano celico)). Tako se trikotna mreža razlikuje od kagome le v tem, da imamo v trikotni le še en bazni vektor več, ker smo dodali še en gradnik (prikazano na Sliki3) in da se primitivna celica zmanjša za štirikrat (vektorji Bravaisove mreže trikotne mreže so namreč dvakrat krajši od kagominih).

Bazni vektorji za trikotno mrežo:
$\vec{r}_{t0} = 0$
$\vec{r}_{t1} = a(1, 0, 0)$
$\vec{r}_{t2} = a(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0)$
$\vec{r}_{t3} = a(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0)$
Izračunajmo strukturni faktor:
$S(\vec{K}) = \sum_{i=0}^{3} f e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_{ti}} = f(1 + e^{-i\pi m_1} + e^{-i\pi m_2} + e^{-i\pi(m_2 - m_1)})$

Sedaj ponovno pogledamo za različne $m_1$, $m_2$ intenzitete in ugotovimo:

| | sod red | lih red |
|---|---|---|
| kagoma | $I = 9f^2$ | $I = f^2$ |
| trikotna | $I = 16f^2$ | $I = 0$ |

Vidimo, da lahko lihe rede ločimo. A tu se pojavi vprašanje, če so te ničle res ničle ali pa smo izračunali neke vrhove z intenziteto nič,

ki jih sploh ni in ali so naši redi pomešani. Da bi se temu vprašanju izognili, bi morali vzeti npr.tisto primitivno celico kagome na Sliki2, ki ima obliko deltoida (intenzitete pridejo enake kot v primeru, ki smo si ga mi izbrali - imamo namreč enako veliki celici) in bi za trikotno mrežo odvzeli le stranske gradnike stran (ostati mora le en gradnik na sredi primitivne celice). Lahko pa sicer delamo z s prvotno celico in le odmislimo bazo, saj je trikotna mreža Bravaisova in za vsako Bravaisovo mrežo je strukturni faktor kar enak atomskemu. Torej:
$S(\vec{k}) = f$ ker $\vec{r}_i = 0 \forall i$.

Tako tudi tu dobimo tri vrhove: enega za sod ter dva za lih red:

| red | $m_1$ | $m_2$ | $I$ |
|---|---|---|---|
| sod | sod | sod | $f^2$ |
| lih | lih | lih | $f^2$ |
| | lih | sod | $f^2$ |

Ker ni niti eden vrh enak nič, lahko mreži razlikujemo le tako, da pogledamo katera ima en vrh bistveno večji od ostalih dveh in katera ima vse vrhove enako velike.

Vemo pa, da obstaja neka maksimalna valovna dolžina oz. minimalni valovni vektor, ki pove, ali se bo z valovanjem sploh kaj zgodilo (iz Slike4 je očitno, da če je premajhen vhodni valovni vektor, valovanja mreža sploh ne bo zaznala). Iz Slike4 prav tako lahko zapišemo:
$k_{min} = \frac{K_{min}}{2} = \frac{2\pi}{\lambda_{max}}$ (upoštevamo elastično sipanje).

Tako da lahko zapišemo: $\lambda_{max} = \frac{4\pi}{K_{max}}$.

Izračunamo na tem mestu velikost $\vec{K}$:
$\vec{K} = \frac{\pi}{a}(m_1, \frac{1}{\sqrt{3}}(2m_2 - m_1), \frac{m_3}{3})$
$K = \frac{\pi}{a}\sqrt{\frac{4}{3}m_1^2 + \frac{4}{3}m_2^2 - \frac{4}{3}m_1 m_2 + \frac{m_3^2}{c^2}}$

Sedaj pogledamo kaj da za $K$ prvi red sipanja za različne $m_1$ in $m_2$:

| $m_1$ | $m_2$ | $K$ |
|---|---|---|
| 0 | 1 | $\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{\pi}{a}$ |
| 1 | 1 | $\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{\pi}{a}$ |
| 1 | 2 | $\sqrt{\frac{12}{3}}\frac{\pi}{a}$ |
| 1 | ... | pada |

Dobimo torej:
$K_{min} = \frac{2}{\sqrt{3}}\frac{\pi}{a}$ oz.
$\lambda_{\mathbf{max}} = \mathbf{2\sqrt{3}a}$

Vendar ta rezultat ustreza kagomi v mreži kagome. Da pa še izračunamo maksimalno valovno dolžino trikotne mreže v mreži kagome, ki smo ji dodali po en gradnik tako, da smo dobili trikotno mrežo, moramo še upoštevati, da so vektorji Bravaisove mreže trikotne mreže dvakrat krajši od kagominih oz. da je vektor recipročne mreže dvakrat daljši.

Tako lahko zapišemo:
$K_{min} = \frac{4}{\sqrt{3}}\frac{\pi}{a}$ oz.
$\lambda_{\mathbf{max}} = \mathbf{\sqrt{3}a}$

Z drugimi besedami: če je valovna dolžina večja od $\lambda_{max}$ za trikotno mrežo in manjša od $\lambda_{max}$ za kagomo, bi mreži lahko ločili, saj se na trikotni ne bi prav nič zgodilo, medtem pa bi kagoma nekaj dala. Vendar ju ne ločimo, ker kot že povedano, pri trikotni mreži ne izgine niti en vrh (ko opravljamo meritev, ne moremo združevati atomov v neke enote, tako da bi pogledali eno mrežo v neki bazi druge, ampak bi lahko rekli, da vsako mrežo pogledamo v njej lastni bazi (tu sem izraz baza rabila čisto matematično)).

## Ravninski mreži z dvema tipoma atomov

a) 1. **Primitivna celica, baza za obe strukturi**

Primitivni celici, vektorji Bravaisove mreže ter bazi za obe strukturi sta prikazani na Sliki5.

Vektorji Bravaisove mreže za mrežo $\alpha$:
$\vec{a}_1 = a(1,0,0)$
$\vec{a}_2 = a(0,1,0)$
$\vec{a}_3 = a(0,0,c)$

Vektorji Bravaisove mreže za mrežo $\beta$:
$\vec{a}_1 = 2a(1,0,0)$
$\vec{a}_2 = a(1,1,0)$
$\vec{a}_3 = a(0,0,c)$

Baza za mrežo $\alpha$:
$\vec{r}_0 = (0,0,0)$
$\vec{r}_1 = \frac{a}{2}(1,0,0)$
$\vec{r}_2 = \frac{a}{2}(0,1,0)$
Tu edino $\vec{r}_0$ predstavlja polno označene gradnike.

<u>Baza</u> za mrežo $\beta$:
$\vec{r}_0 = (0, 0, 0)$
$\vec{r}_1 = (0, \eta, 0)$
$\vec{r}_2 = (0, -\eta, 0)$
$\vec{r}_3 = (a - \epsilon, 0, 0)$
$\vec{r}_4 = (-a + \epsilon, 0, 0)$
$\vec{r}_5 = (a, 0, 0)$
Tu pa sta $\vec{r}_0$ ter $\vec{r}_5$ polno označena gradnika.

2. **Recipročna mreža za obe strukturi**

   *Recipročna mreža za mrežo* $\alpha$:

   Vektorski produkti:
   $\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = a^2(0, 0, 1)$
   $\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = a^2(c, 0, 0)$
   $\vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = a^2(0, c, 0)$

   Volumen:
   $V_0 = |(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)| = ca^3$

   Vektorji <u>recipročne mreže</u>:

$$\vec{\mathbf{b}}_\mathbf{1} = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{V_0} = \frac{\mathbf{2}\pi}{\mathbf{a}}(\mathbf{1}, \mathbf{0}, \mathbf{0})$$

$$\vec{\mathbf{b}}_\mathbf{2} = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{V_0} = \frac{\mathbf{2}\pi}{\mathbf{a}}(\mathbf{0}, \mathbf{1}, \mathbf{0})$$

$$\vec{\mathbf{b}}_\mathbf{3} = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{V_0} = \frac{\pi}{\mathbf{ca}}(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{1})$$

   *Recipročna mreža za mrežo* $\beta$:

   Vektorski produkti:
   $\vec{a}_1 \times \vec{a}_2 = 2a^2(0, 0, 1)$
   $\vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = a^2c(1, -1, 0)$
   $\vec{a}_3 \times \vec{a}_1 = 2a^2c(0, 1, 0)$

   Volumen:
   $V_0 = |(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)| = 2ca^3$

   Vektorji <u>recipročne mreže</u>:

$$\vec{\mathbf{b}}_\mathbf{1} = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{V_0} = \frac{\pi}{\mathbf{a}}(\mathbf{1}, -\mathbf{1}, \mathbf{0})$$

$$\vec{\mathbf{b}}_\mathbf{2} = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{V_0} = \frac{\mathbf{2}\pi}{\mathbf{a}}(\mathbf{0}, \mathbf{1}, \mathbf{0})$$

$$\vec{\mathbf{b}}_{\mathbf{3}} = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{V_0} = \frac{\mathbf{2}\pi}{\mathbf{ca}}(\mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{1})$$

3. **Točkovne simetrijske operacije za obe mreži (primerjava)**

   Točkovne simetrijske operacije iščemo okoli točk v mreži. Ni vedno enakih simetrij okoli različnih točk, kot npr. vidimo v strukturi na Sliki6: če se vsedemo na bel gradnik, imamo največ dvoštevno os, če se pa vsedemo na črnega ali pa na sredino primitivne celice, potem imamo štirištevno os. Da ne bo pomote, gledamo potemtakem vedno tiste točke z največjo simetrijo. Na Sliki6 so narisane ustrezne simetrijske operacije za naš primer.

| sim. operacije | mreža $\alpha$ | mreža $\beta$ |
|---|---|---|
| rotacija/števnost osi | $C_4$ | $C_2$ |
| zrcalne ravnine | $\sigma_x$, $\sigma_y$, $\sigma_{xy}$, $\sigma_{x-y}$ | $\sigma_x$, $\sigma_y$ |
| inverzija | $I$ | $I$ |

   Tu $C_n$ predstavlja $n$-števno os oz. minimalni kot za katerega lahko zavrtimo mrežo okoli točke na kateri "sedimo" je $\frac{2\pi}{n}$. Vidimo, da po faznem prehodu iz mreže $\alpha$ v mrežo $\beta$ izgubimo določene simetrije: števnost osi pade iz 4 na 2, prav tako pa tudi število zrcalnih ravnin (iz 4 zrcalnih ravnin dobimo le 2). Med drugim pa ima primitivna celica mreže $\alpha$ 2-krat manjši volumen kot primitivna celica mreže $\beta$.

b) **Primerjava uklonskih slik obeh mrež (razlike)**

Iz Slik5,6 je razvidno da mrežo $\alpha$ dobimo iz mreže $\beta$ tako, da rečemo $\epsilon = \eta = \frac{a}{2}$. Tako je dovolj, če izračunamo uklonsko sliko le za mrežo $\beta$ in potem za to splošno izberemo različne vrednosti $\epsilon$ ter $\eta$ (med drugim tudi tisti vrednosti, ki določata mrežo $\alpha$, stvari zvezane s tem poimenujem $\beta\alpha$) in jih med sabo primerjamo. Še prej pa lahko izračunamo za $\alpha$ mrežo z drugače izbranimi vektorji (ki so na sliki $\alpha$ mreže; stvari s tem povezane pa poindeksiramo z $\alpha$) in potem primerjamo intenziteti. Vemo še da je mreža $\alpha$ 4-krat manjša od mreže $\beta\alpha$.

Zapišemo vektor recipročne mreže ($\vec{K} = m_1\vec{b}_1 + m_2\vec{b}_2 + m_3\vec{b}_3$), strukturni faktor ($S(\vec{K}) = \sum_{j=1}^{s} e^{-i\vec{K}\cdot\vec{r}_j} f_j$) ter intenziteto ($I(\vec{K}) \propto N^2|S(\vec{K})|^2$) za mrežo $\alpha$:

$$\vec{K}_\alpha = \frac{2\pi}{a}(m_1, m_2, \frac{m_3}{c})$$

$$S_\alpha(\vec{K}_\alpha) = \sum_{j=0}^{2} e^{-i\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_{j\alpha}} f_j = f_B + f_A[(-1)^{m_1} + (-1)^{m_2}]$$

$$I_\alpha(\vec{K}_\alpha) \propto f_B^2 + 2f_A^2(1 + (-1)^{m_1+m_2}) + 2f_A f_B((-1)^{m_1} + (-1)^{m_2})$$

Tako lahko še tabeliramo intenzitete za različne rede in različne $m_1$ ter $m_2$:

| red | $m_1$ | $m_2$ | $I_\alpha$ |
|---|---|---|---|
| sod | sod | sod | $f_B^2 + 4f_A^2 + 4f_A f_B$ |
| lih | sod | lih | $f_B^2$ |
| | lih | lih | $f_B^2 + 4f_A^2 - 4f_A f_B$ |

Zapišemo vektor recipročne mreže, strukturni faktror ter intenziteto za mrežo $\beta$:

$$\vec{K}_\beta = \frac{2\pi}{a}(\frac{m_1}{2}, -\frac{m_1}{2} + m_2, \frac{m_3}{c})$$

$$\begin{aligned}
S_\beta(\vec{K}_\beta) &= \sum_{j=0}^{2} e^{-i\vec{K}_\beta\cdot\vec{r}_{j\beta}} f_j = f_B(e^{-i\vec{K}_\beta\cdot\vec{r}_{0\beta}} + e^{-i\vec{K}_\beta\cdot\vec{r}_{5\beta}}) + \\
&+ f_A(e^{-i\vec{K}_\beta\cdot\vec{r}_{1\beta}} + e^{-i\vec{K}_\beta\cdot\vec{r}_{2\beta}} + e^{-i\vec{K}_\beta\cdot\vec{r}_{3\beta}} + e^{-i\vec{K}_\beta\cdot\vec{r}_{4\beta}}) = \\
&= f_B(1 + (-1)^{m_1}) + 4f_A\cos(\frac{\pi}{2}(\frac{\eta}{a}(2m_2 - m_1) + (1 - \frac{\epsilon}{a})m_1)) \\
&\quad \cos(\frac{\pi}{2}(\frac{\eta}{a}(2m_2 - m_1) - (1 - \frac{\epsilon}{a})m_1))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_\beta(\vec{K}_\beta) &\propto S_\beta(\vec{K}_\beta)|^2 = 2f_B^2(1 + (-1)^{m_1}) + \\
&+ 16f_A^2\cos^2(\frac{\pi}{2}(\frac{\eta}{a}(2m_2 - m_1) + (1 - \frac{\epsilon}{a})m_1)) \\
&\quad \cos^2(\frac{\pi}{2}(\frac{\eta}{a}(2m_2 - m_1) - (1 - \frac{\epsilon}{a})m_1)) + \\
&+ 8f_A f_B(1 + (-1)^{m_1})\cos(\frac{\pi}{2}(\frac{\eta}{a}(2m_2 - m_1) + (1 - \frac{\epsilon}{a})m_1)) \\
&\quad \cos(\frac{\pi}{2}(\frac{\eta}{a}(2m_2 - m_1) - (1 - \frac{\epsilon}{a})m_1))
\end{aligned}$$

Sedaj rečemo $\epsilon = \eta = \frac{a}{2}$ in dobimo:

$$\begin{aligned}
I_{\beta\alpha}(\epsilon = \eta = \frac{a}{2}) &\propto 2f_B^2(1 + (-1)^{m_1}) + \\
&+ 16f_A^2\cos^2(\frac{\pi m_2}{2})\cos^2(\frac{\pi(m_2 - m_1)}{2}) + \\
&+ 8f_A f_B(1 + (-1)^{m_1})\cos^2(\frac{\pi m_2}{2})\cos^2(\frac{\pi(m_2 - m_1)}{2})
\end{aligned}$$

Pogledamo različne rede in različne $m_1$ in $m_2$ ter vse tabeliramo:

$\epsilon = \eta = \frac{a}{2}$

| red | $m_1$ | $m_2$ | $I_{\beta\alpha}$ |
|---|---|---|---|
| lih | sod | lih | $4f_B^2$ |
| | lih | lih, sod | 0 |
| sod | $2+4l$ | $2k$ | $4f_B^2 - 16f_Af_B + 16f_A^2$ |
| | $0+4l$ | $2+2k$ | $4f_B^2 + 16f_Af_B + 16f_A^2$ |
| 0 | 0 | 0 | $4f_B^2$ |

Kjer sta $k, l \in \mathbf{Z}$. Vidimo, da se tabeli za $I_{\beta\alpha}$ in $I_\alpha$ ne ujemata popolnoma. To pa zato, ker je celica $\beta\alpha$ večja od prejšnje (eno ravnino smo dali v strukturni faktor). Zaradi tega moramo tudi dobiti v večji celici veliko intenzitet enakih 0, ker ponekod dobimo več kotov in izračunanih intenzitet, ki jih v bistvu sploh ni. Iz tabele $\alpha$ vemo kaj mora priti. Tako pa lahko zaključimo, da nam večja celica da vse intenzitete (po velikosti se neničelne ujemajo, če še upoštevamo, da je celeca $\beta$ dvakrat večja od celice $\alpha$ oz. da je $I_{\beta\alpha} = 4I_\alpha$), le da imamo pomešane rede ter položaje.

$\epsilon = \eta = \frac{a}{4}$

| sod red | $m_1$ | $m_2$ | $I_{\beta_4}$ |
|---|---|---|---|
| $n = 2+4k$ | sod | sod | $4f_B^2$ |
| $n = 0+8k$ | sod | sod | $4f_B^2 + 16f_Af_B + 16f_A^2$ |
| $n = 4+8k$ | $n$ | $0+nl$ | $4f_B^2 - 16f_Af_B + 16f_A^2$ |
| | $n+n2l$ | $n$ | $4f_B^2 - 16f_Af_B + 16f_A^2$ |
| | $0+n2l$ | $n$ | $4f_B^2 + 16f_Af_B + 16f_A^2$ |
| **lih red** | $m_1$ | $m_2$ | $I_{\beta_4}$ |
| $n$ | $0+8nl$ | $n$ | $4f_B^2 + 8f_Af_B + 4f_A^2$ |
| | $2n+8nl$ | $n$ | $4f_B^2 + 8f_Af_B + 4f_A^2$ |
| | $4n+8nl$ | $n$ | $4f_B^2 - 8f_Af_B + 4f_A^2$ |
| | $5n+8nl$ | $n$ | $4f_B^2 - 8f_Af_B + 4f_A^2$ |
| | $n+4nl$ | $n$ | 0 |
| | $3n+4nl$ | $n$ | $8f_A^2$ |
| | $n$ | $0+4nl$ | 0 |
| | $n$ | $n+4nl$ | 0 |
| | $n$ | $2n+4nl$ | $8f_A^2$ |
| | $n$ | $3n+4nl$ | $8f_A^2$ |

Kjer sta $k, l \in \mathbf{Z}$.

$\epsilon = \eta = 0$

| red | $m_1$ | $m_2$ | $I_{\beta_0}$ |
|---|---|---|---|
| sod | sod | sod | $4f_B^2 + 16f_Af_B + 16f_A^2$ |
| lih | sod | lih | $4f_B^2 + 16f_Af_B + 16f_A^2$ |
| | lih | lih, sod | 0 |

Če primerjamo sedaj še intenzitete $\beta\alpha$, $\beta_4$ ter $\beta_0$, vidimo, da je število različno "visokih"intenzitet različno (kot si sledijo: 4 (oz. 3 za $\alpha$ mrežo), 6 ter 2). Torej bi lahko mreže razlikovali po številu različnih intenzitet.

c) 1. **Možne ureditve oktaedrov z eno podaljšano osjo in ostalima enako skrajšanima**

Na Sliki7 je prikazan oktaeder s katerim lahko pokrijemo tridemenzionalno mrežo. Ta oktaeder deformiramo tako, da mu podaljšamo le eno izmed osi, drugi dve pa obe enako skrajšamo. Zanimajo nas možne zapolnitve prostora s temi novimi oktaedri.

Poglejmo si najprej primer, ko so dolge osi vedno v ravnini in ima vsaka celica svojo dolgo os pravokotno na vse sosednje dolge osi.

Na Sliki8 je očitno, da v tridemenzionalni mreži ne moremo imeti dolgih osi v treh med seboj pravokotnih smereh, saj s tako formacijo ne moremo pokriti celega prostora (krajni točki dveh med seboj pravokotnih oktaedrov se ne stikata). Zato gradniki $B$ ne morejo ostati na položajih, ki bi jih zasedali v mreži iz prvotnih (nedeformiranih) oktaedrov, zato mreža iz $B$ gradnikov ni več kubična, ampak je le še podobna kubični, zato se tudi morajo razdalje med sosednjimi $B$ gradniki spremeniti (in ne le med $A$). Torej če dovolimo spremembo lege $B$ gradnikov (zahteva je le, da so vsi $B$ gradniki na sredini oktaedrov v dani ravnini enako oddaljeni od $B$ gradnikov iz sosednjih ravnin), lahko dobimo dve ravnini (drugo dobimo iz prve s translacijo vzoredno zveznicam med atomi $B$ z velikostjo vektorja premika enako razdalji med gradniki $B$ v obeh ravninah). Ti dve ravnini pa sedaj lahko poljubno zlagamo eno na drugo (seveda mora kristal še vedno ostati kristal, kar pomeni da moramo imeti neko periodičnost v ponavljanju ravnin). Lahko ju zlagamo kot: A A..., AB AB..., AABB AABB..., ABA ABA... in še na polubno mnogo kombinacij. To se vidi na Sliki9.

Poglejmo si še primer, ko dolge osi niso vedno v ravnini in ima vsaka celica svojo dolgo os pravokotno na vse sosednje dolge osi.

Na Sliki10 je prikazana ena izmed takih formacij, ki ima skupno z zgornjimi to, da naslednjo ravnino dobimo tako, da jo premaknemo vzdolž zveznic med $B$ gradniki ravno za razdaljo med njimi. Na tak način zlagamo vse možne kombinacije parov oktaedrov (v ravnini), ki imajo vsi dolge osi pravokotne med seboj. Ti pari so prikazani na Sliki11 , na kateri so označene le dolge osi (pika pomeni dolgo os, ki gleda iz ravnine ven). Ravnine, ki jih tvorimo iz takih kombinacij oktaedrov, pa si sledijo le kot AB AB. . . (ne moremo pa imeti npr. A A. . . , saj s tako kombinacijo ne pokrijemo prostora: to ne velja za primer a iz Slike11, katerega smo obdelali zgoraj). Če pogledamo sedaj Slike9,10 oz. Sliko11 bolje, vidimo, da so vse enake, razlikujejo se le v tem, katere ravnine gledamo kot vodoravne.

Poglejmo si pa še primer, ko so dolge osi vedno v ravnini in so vzporedne.

Na Sliki12 se vidi, da če imamo v eni ravnini vse deformirane oktaedre z dolgimi osmi v isti smeri, morajo biti točno tako postavljene tudi v ostalih ravninah, saj drugače ne moremo pokriti celega prostora (ponekod se oktaedri niti ne dotikajo oz. se prekrivajo). Tako imamo kristal, v katerem si ravnine sledijo kot A A. . . (Slika12).

2. **Sprememba razdalj med atomi B**

   Kot smo ugotovili zgoraj, se morajo gradniki $B$ približati en drugemu oz. lahko ostanejo na prvotnih mestih, če se dolga os podaljša za enako dolžino kot se krajši skrajšata. Na Sliki13 je prikazan premik gradnikov $B$. Določimo še vrednosti premikov, če se polovica dolge osi podalša za $\xi$, polovica krajše pa ze $\epsilon$:

   Razdalja med kratkima osema (modra na sliki):
   $$\frac{a}{2} - \epsilon + \frac{a}{2} - \epsilon = a - 2\epsilon$$
   Razdalja med kratko in dolgo osjo (rdeča na sliki):
   $$\frac{a}{2} + \xi + \frac{a}{2} - \epsilon = a + \xi - \epsilon$$
   Razdalja med dolgima osema (zelena na sliki):
   $$\frac{a}{2} + \xi + \frac{a}{2} + \xi = a + 2\xi$$

3. **Bravaisova mreže, ki ustrezajo posameznim možnim ureditvam**

   Kot smo že ugotovili, se razdalje med gradniki $B$, ki so prej tvorili kubično mrežo, spremenijo. Zato se spremeni tudi oblika osnovne celice, ki pa ni več kubična. Na Sliki9 sta označeni osnovni celici z rdečima kvadratkoma. Vidimo, da za levo mrežo velja $c \neq a = b$ ter $\alpha = 90° \neq \beta = \gamma$ (triklinski sistem z dodatno simetrijo ter bazo), za desno $c \neq a = b$ ter$\alpha = \beta = \gamma = 90°$ (tetragonalna mreža z bazo). Na Sliki10 je desna oz. leva mreža enaka kot desna oz. leva na Sliki9. Na Sliki12 pa je osnovna celica desne mreže označena z modrim kvadratkom (dve možnosti), ki označuje celico za katero velja $c \neq a = b$ ter $\alpha = \beta = \gamma = 90°$ (tetragonalna mreža z bazo).